

**Аннотационный отчет
научно-исследовательской работы**

***ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛИ ХАРТРИ–ФОКА–СЛЭТЕРА
ПРИМЕНИТЕЛЬНО К РАСЧЁТУ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ
СМЕСИ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ
И ТЕМПЕРАТУРАХ***

Исполнитель: м.н.с. лаборатории 1.1.3 Кадатский Максим Алексеевич

Квантово-статистическая модель Хартри–Фока–Слэтера успешно применяется для построения уравнения состояния простых веществ в широком диапазоне температур и плотностей. В рамках этой работы данная модель применяется для расчета термодинамических свойств смесей различных химических элементов. Исследовались особенности модели, которые не наблюдаются в случае простого вещества.

Основные результаты работы

Разработаны и реализованы алгоритмы расчёта полных термодинамических функций для простых веществ и смесей химических элементов в рамках квантово-статистического подхода.

Впервые в рамках модели Хартри–Фока–Слэтера (ХФС) при различных ионных вкладах рассчитаны ударные адиабаты для смеси химических элементов. Для образцов кварца с разной начальной пористостью ($m = 1, 1.514, 1.963, 8.333, 13.25$) расчёты проведены в диапазоне давлений от 1 до 10^7 ГПа (рис. 1). Аналогичные результаты были получены и для углеводородных соединений (СН и СН₂).

На примере алюминия и диоксида кремния реализован подход комплексного сравнения ударных адиабат рассчитанных для различных комбинаций электронных, рассчитанных по квантово-статистическим моделям Томаса–Ферми, Томаса–Ферми с поправками и Хартри–Фока–Слэтера, и ионных, рассчитанных по моделям идеального газа (ИГ), однокомпонентной плазмы (ОКП) и заряженных твёрдых сфер (ЗТС), частей с экспериментальными данными (рис. 2).

На примере алюминия получена количественная оценка величины погрешности определения волновой скорости для экспериментального наблюдения осцилляционных эффектов при ударном сжатии ($\Delta < 0.5\%$).

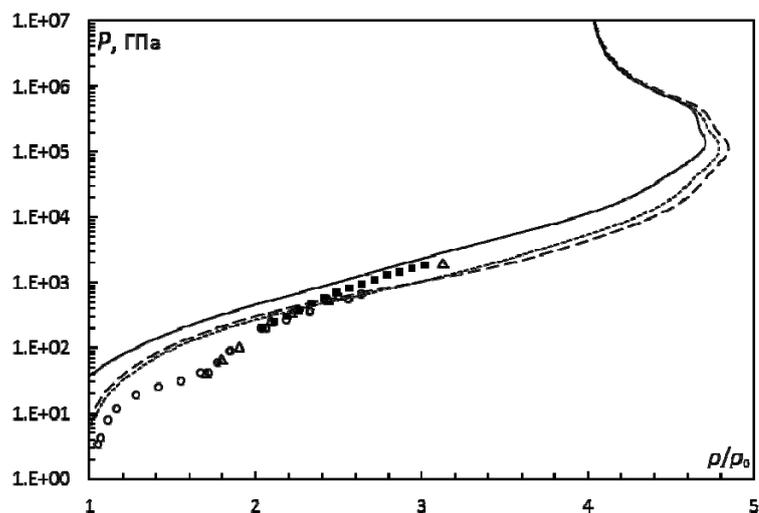


Рис. 1. Ударная адиабата кварца (образец с начальной плотностью $\rho_0 = 2.65 \text{ г/см}^3$). Электронный вклад в термодинамику рассчитан по модели ХФС. Приведены результаты при различных ионных вкладах в термодинамические функции. Пунктирная линия – модель ИГ. Штриховая линия – модель ОКП. Сплошная линия – модель ЗТС. Экспериментальные данные: \circ – [Трунин Р. Ф., Симаков Г. В., Подурец М. А. 1971]; Δ – [Трунин Р. Ф. 1994]; \blacksquare – [Qi T. (at al.) 2015].

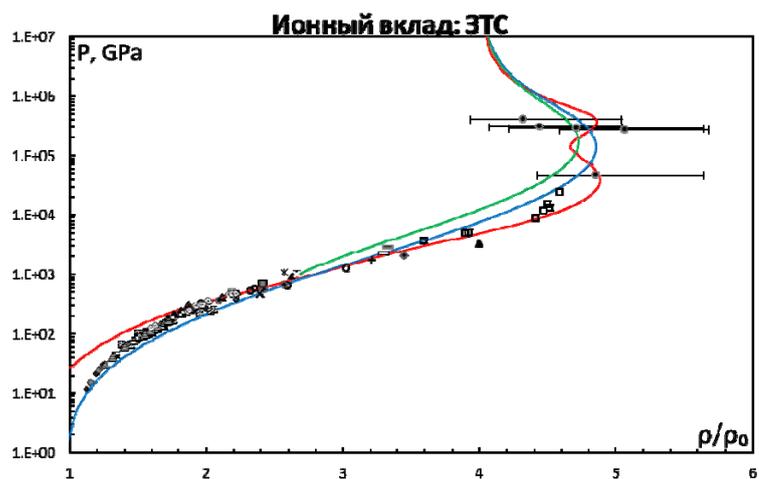


Рис. 2. Ударная адиабата алюминия, рассчитанная по различным моделям в сравнении с экспериментальными данными (маркеры). Ионный вклад в термодинамику рассчитан по модели ЗТС. Зелёная линия — модель ТФ. Синяя линия — модель ТФП. Красная линия — модель ХФС.

Исполнение плана-графика работ

Срок	Название этапа	Полученные результаты
Ноябрь 2014	Программная реализация модели ХФС с учётом зонной структуры	В рамках модели ХФС был реализован метод учёта зонной структуры вещества с использованием квазипериодических граничных условий. Учёт зонной структуры позволил получать гладкие кривые термодинамических функций на всём расчётном диапазоне. Для простого вещества, на примере алюминия, была произведена верификация разработанных программных алгоритмов путём сравнения с аналогичными расчётами других авторов.
Декабрь 2014 –	Получение таблиц термодинамических	На примере алюминия, было произведено сравнение результатов, полученных по модели ХФС, с результатами по

Январь 2015	функций и сравнение с другими моделями	моделям Томаса–Ферми (ТФ) и Томаса–Ферми с квантовой и обменной поправками (ТФП). Произведено сравнение с экспериментальными данными. Результаты работы представлены в статье [1].
Февраль 2015 – Апрель 2015	Построение ударных адиабат, сравнение с экспериментальными данными и химической моделью плазмы.	Для образцов диоксида кремния и углеводородных соединений были построены ударные адиабаты. Произведено сравнение с экспериментальными данными по ударно-волновому сжатию. Результаты работы были представлены на конференции [3].
Май 2015 – Июнь 2015	Теоретическое описание некоторых наблюдаемых эффектов в смесях в рамках модели ХФС	Обоснован факт избыточности согласования химических потенциалов элементов смеси в квантово-статистических моделях, обладающих свойством автомодельности. Исследовано осцилляционное поведение кривой ударной адиабаты в рамках модели ХФС. Отдельные качественные и количественные результаты были изложены в магистерской диссертации [2].
Июль 2015 – Ноябрь 2015	Разработка оптимального вычислительного алгоритма для расчёта сложных систем	Разработана методика расчёта термодинамики сложных систем (более 4-х элементов в соединении), но при этом не был реализован эффективный программный алгоритм, в связи с возникновением трудностей программистского характера.

Статьи в рецензируемых изданиях

- [1] *Kadatskiy M. A., Khishchenko K. V.* Comparison of Hugoniot calculated for aluminium in the framework of three quantum-statistical models // *Journal of Physics: Conference Series.* – 2015. [в печати]

Прочие публикации

- [2] *Кадатский М.А.* Расчёт термодинамических свойств простых веществ и смесей по модели Хартри–Фока–Слэтера: выпускная квалификационная работа (магистерская диссертация). Московский физико-технический институт (государственный университет), Москва, 2015.
- [3] *Kadatskiy M.A., Khishchenko K.V.* Hugoniot calculation for CH and CH₂ based on Hartree–Fock–Slater model // *XXX International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter - ИЕФМ-2015 (Elbrus, Russia, 01.03 - 06.03.2015): Book of Abstracts.* – Moscow & Chernogolovka & Nalchik: 2015. - P.148. - ISBN 978-5-7558-0558-2.

Личные выступления на конференциях и семинарах

- XXX International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter. Elbrus, Russia. 01.03.2015 -06.03.2015. *Kadatskiy M.A., Khishchenko K.V.* Hugoniot calculation for CH and CH₂ based on Hartree–Fock–Slater model
- Международная конференция XVII Харитоновские тематические научные чтения «Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны». Саров, Россия. 23.03.2015 - 27.03.2015. *Kadatskiy M.A., Khishchenko K.V.* Hugoniot calculation for silica and iron based on Hartree–Fock–Slater model
- Семинар Теоретического отдела им. Л.М. Бибермана под руководством профессора В.С. Воробьёва. Москва, Россия. 25.06.2015. *Кадацкий М.А. Хищенко К.В.* Ударная сжимаемость элементов и смесей в рамках модели Хартри–Фока–Слэтера.
- VIII International Conference on Plasma Physics and Plasma Technology. Minsk, Belarus. 14.09.2015 - 18.09.2015. *Kadatskiy M.A., Khishchenko K.V.* Quantum-statistical calculations of thermodynamic properties of hydrocarbons at high energy densities